Chimie théorique

Niveau d'étude
BAC +2

ECTS
3 crédits

Composante
Faculté des sciences

En bref

- Langue(s) d'enseignement: Français
- Ouvert aux étudiants en échange: Oui

Présentation

Description

L'UE se compose d'une matière enseignée sur 2 périodes : Chimie théorique P9 (CM, TD) et Chimie théorique P10 (CM, TD)

Objectifs

Période 9
A l'échelle moléculaire, la chimie est essentiellement une histoire d'électrons. Comment quelques électrons peuvent former des édifices, les molécules, aussi stables ? Qu'est-ce qu'une liaison chimique ? Pourquoi certaines molécules réagissent entre elles ? Peut-on prédire le résultat de ces réactions ? Ce cours a pour but de présenter la seule théorie décrivant correctement la structure électronique : la mécanique quantique !
Contenus : Notions de quantification et de dualité onde-corpuscule. Équation de Schrödinger pour la boîte de potentiel et pour l'atome d'hydrogène. Diagramme d'orbitales moléculaires obtenu par combinaison linéaire d'orbitales atomiques.

Période 10
A l'échelle moléculaire, la chimie est essentiellement une histoire d'électrons. Comment quelques électrons peuvent former des édifices, les molécules, aussi stables ? Qu'est-ce qu'une liaison chimique ? Pourquoi certaines molécules réagissent entre elles ? Peut-on prédire le résultat de ces réactions ? Ce cours a pour but de présenter la seule théorie décrivant correctement la structure électronique : la mécanique quantique !
Contenus : Connaître la structure électronique des atomes du groupe principal. Connaître la structure électronique (diagramme d'orbitales moléculaires) de fragments simples (H2, H3, AH2, AH, AH3). Utiliser de façon pertinente le

Informations non contractuelles.
Dernière mise à jour le 04 mars 2024

vocabulaire particulier de cette matière. Connaître la structure électronique (diagramme d'orbitales moléculaires) de molécules diatomiques du groupe principal. Distinguer les éléments de symétrie au sein d'une molécule. Faire le lien la structure électronique, la réactivité, le schéma de Lewis, la notion de valence et d'atome. Comprendre la différence entre CLOA et hybridation. Construire une structure plus complexe à partir de fragments simples.

Pré-requis obligatoires

Période 9
Notions et contenus
Le cours fait largement appel aux savoirs basiques en atomistiques : modèle atomique de Bohr, formules développées et notions de liaisons covalentes. Ce cours sera l'occasion de revoir les méthodes VSEPR et d'hybridation,
Concernant le bagage mathématique les concepts essentiels sont : équation différentielle aux valeurs propres, opérateurs et matrices. Mais ils seront représentés lors du cours.

Période 10
Notions et contenus
Le cours fait largement appel aux savoirs basiques en atomistiques : modèle atomique de Bohr, formules développées et notions de liaisons covalentes.
Il poursuit de plus l'UE Chimie théorique 1, où les notions fondamentales de mécanique quantique sont présentées ainsi que le principe des diagrammes d'orbitales moléculaires.
Compétences
- Mobiliser les concepts essentiels des mathématiques, de la physique et de l'informatique dans le cadre des problématiques de la chimie.
- Manipuler les mécanismes fondamentaux à l'échelle microscopique.

Compétences visées

Période 9
Mobiliser les concepts essentiels des mathématiques, de la physique et de l'informatique dans le cadre des problématiques de la chimie.
Manipuler les mécanismes fondamentaux à l'échelle microscopique.

Période 10
Manipuler les mécanismes fondamentaux à l'échelle microscopique. Relier un phénomène macroscopique aux processus microscopiques.

Liste des enseignements

	Nature	CM	TD	TP	Crédits
Chimie théorique	Matière	14,7h	13,3h		3 crédits

Infos pratiques

Informations non contractuelles.
Dernière mise à jour le 04 mars 2024

Lieu(x)

- Angers

Campus

- Campus Belle-beille

Informations non contractuelles.
Dernière mise à jour le 04 mars 2024